



TITLE:

スプラインによる曲線、曲面のあてはめ (数値計算のアルゴリズムの研究)

AUTHOR(S):

秦野, 和郎

CITATION:

秦野, 和郎. スプラインによる曲線、曲面のあてはめ (数値計算のアルゴリズムの研究). 数理解析研究所講究録 1980, 382: 68-96

ISSUE DATE:

1980-04

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/104833>

RIGHT:

スプラインによる曲線、曲面のあてはめ

福井大. エ. 情報 秦野和郎

1. はじめに

実軸上の離散点で観測値が与えられたとき、或いは平面上の格子点で観測値が与えられたとき、それらを最小自乗近似するための近似関数として多項式、三角多項式等が使われてきている。しかし多項式ではうまくゆかない事が多く又、三角多項式は元の関数が十分に滑らかな周期関数の一周期であるときを除いて良好な結果を得られない。

これに対しスプライン関数は柔軟な関数である事から広い範囲の関数を近似しうる可能性を持っており曲線、曲面のあてはめに適した関数であると考えられる。

ここでは多項式スプラインを曲線、曲面のあてはめに適用する手法を述べ、多くの数値例を示す。

2. スプラインによる曲線のあてはめ

離散点、 $a \leq x_r \leq b : 1 \leq r \leq N$ において観測値 f_r 、測定

誤差 \bar{e}_r , 誤差の分布. すなわち $\bar{f}_r = f(\bar{x}_r) + \bar{e}_r$ とおいたとき,

$0 \leq |\bar{e}_r/\bar{p}_r| < i$ である確率 $\Phi_i: 1 \leq i \leq 10$ が与えられたとき,

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b \quad (2.1)$$

を節点とする多項式スプライン

$$S(x) = \sum_{j=-k+1}^{n-1} c_j N_j(x) \quad (2.2)$$

により曲線のあてはめを行う. ここで $N_j(x)$ は正規化された

B-spline である.

$$N_j(x) = (t_{j+k} - t_j) g_k[t_j, t_{j+1}, \dots, t_{j+k}; x]$$

$$g_k(t; x) = (t - x)_+^{k-1} = \begin{cases} (t - x)^{k-1} & : t \geq x \\ 0 & : t < x \end{cases} \quad (2.3)$$

$$t_j = \begin{cases} x_0 & : -k+1 \leq j \leq -1 \\ x_j & : 0 \leq j \leq n \\ x_n & : n+1 \leq j \leq n+k+1 \end{cases}$$

で定義される $k-1$ 次 of 区分的多項式である.

n 及び節点 $x_i: 1 \leq i \leq n-1$ が固定されたとき残差自乗和,

$$S_n^2 = \sum_{r=1}^N \frac{1}{\bar{p}_r^2} \left\{ \bar{f}_r - \sum_{j=-k+1}^{n-1} c_j N_j(\bar{x}_r) \right\}^2 \quad (2.4)$$

を $c_i: -k+1 \leq i \leq n-1$ で偏微分し 0 とおくと正規方程式,

$$\sum_{j=-k+1}^{n-1} c_j \left\{ \sum_{r=1}^N \frac{1}{\bar{p}_r^2} N_i(\bar{x}_r) N_j(\bar{x}_r) \right\} = \sum_{r=1}^N \frac{1}{\bar{p}_r^2} \bar{f}_r N_i(\bar{x}_r) \quad (2.5)$$

$$: -k+1 \leq i \leq n-1$$

を得ることが出来る。 $n+k-1$ 元のこの連立一次方程式の係数行列は B-spline $N_j(x)$ の局所性

$$N_j(x) \begin{cases} > 0 & : i-k+1 \leq j \leq i \\ = 0 & : j < i-k+1, j > i \end{cases} : x \in [x_i, x_{i+1}) \quad (2.6)$$

から $2k-1$ 重対角の対称正值行列となり条件は k が特に大きくない限り比較的良好である。

さて、良好な近似を得るために n , 節点 $x_i: 1 \leq i \leq n-1$ などのようにとるのがよいかをあらかじめさめるのは困難である。従って次のようにして n , $x_i: 1 \leq i \leq n-1$ をさめる。

(i) $n=1$ (この場合、 $S(x)$ は単一の $k-1$ 次多項式) として式(2.5) から $c_j: -k+1 \leq j \leq n-1$ を求め、 $\tilde{e}_r = \bar{f}_r - S(\bar{x}_r)$ を計算して $P\{|\tilde{e}_r/\bar{e}_r| \leq i\} = \Psi_i: 1 \leq i \leq 10$ を算出し、もし $\Psi_i \leq \bar{\Psi}_i: 1 \leq i \leq 10$ が満足されていれば計算を終了する。そうでなければ(ii) の step へ進む。

(ii) \tilde{e}_r から部分区間 $[x_i, x_{i+1})$ における残差自乗部分和を計算し、それが最も大きい区間の中点を新しい節点として追加し、 n を 1 つ増加させる。次に式(2.5) から c_j を算出して $\tilde{e}_r = \bar{f}_r - S(\bar{x}_r)$ を計算し、 $P\{|\tilde{e}_r/\bar{e}_r| \leq i\} = \Psi_i: 1 \leq i \leq 10$ を得て $\bar{\Psi}_i \geq \Psi_i: 1 \leq i \leq 10$ が満足されていれば終了、そうでなければこの step を反復する。

これらの各段階において統計量

$$\begin{aligned} S_n^2 &= \sum_{r=1}^N \frac{1}{n_r^2} \{ \bar{f}_r - S(\bar{x}_r) \}^2 \\ G_n^2 &= S_n^2 / \{ N - (n+k-1) \} \\ AIC &= N \ln S_n^2 + 2(n+k-1) \end{aligned} \quad (2.7)$$

を計算しておく。

上の (ii) の step を実行中、 S_n^2 がある程度以下になったらそれ以降、節点 x_i を変数として扱ってそれらを修正すると、最終結果としてより少ない n で同程度の近似を得られることがある。

ここでは一つの試みとして、残差自乗和 $J = S_n^2$ の x_i に関する gradient $g = (g_1, g_2, \dots, g_m)^T$, $g_i = \partial J / \partial x_i$ 及び x_i に関する Hessian $H = (h_{ij})$, $h_{ij} = \partial^2 J / \partial x_i \partial x_j$ を算出して Levenberg の手法を適用して、非線型パラメータ x_i を修正した。

以下に上の手順で得られたいくつかの計算例を示す。

図 2.1a で KPROG=1 とあるのは、この結果が n 及び x_i をあらかじめ与えて計算したものであることを示す。図 2.2a で KPROG=2 とあるのは、節点 x_i を $n=1$ から始めて順に追加していつで得られた結果であることを示す。更に図 2.3a で KPROG=3 とあるのは (ii) の step の途中から節点を修正して得

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG=1 N=10 K=4 DELTA**2=1.2709 (4)
 SIGMA**2=6.7603 (1) AIC=1.9254 (3)
 F(-1.8801 (1) , 1.5220 (2)) , E(-4.4889 (1) , 8.8848 (1))

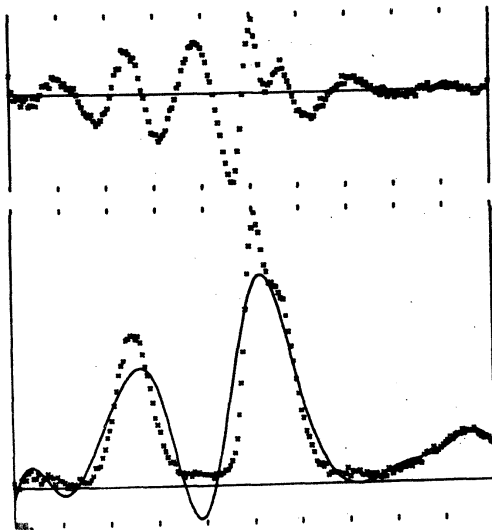


图 2.1a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG=1 N=10 K=4 DELTA**2=1.2710 (4)
 F(-1.8803 (1) , 1.1788 (2)) , D(-5.4885 (0) , 8.8455 (0))

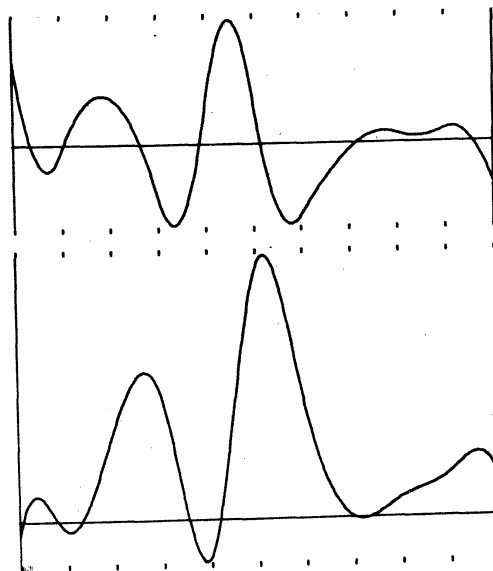


图 2.1b

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG=2 N=20 K=4 DELTA**2=1.7673 (2)
 SIGMA**2=9.9287 (-1) AIC=1.0861 (3)
 F(-4.0000 (-1) , 1.5280 (2)) , E(-9.7082 (0) , 4.7082 (0))

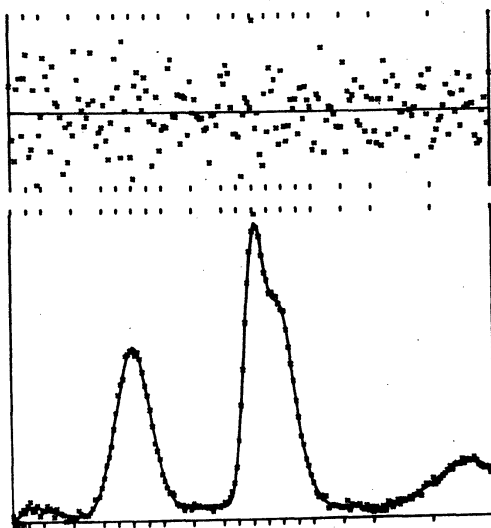


图 2.2a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG=2 N=20 K=4 DELTA**2=1.7674 (2)
 F(1.2817 (0) , 1.4780 (2)) , D(-9.8877 (0) , 2.0485 (1))

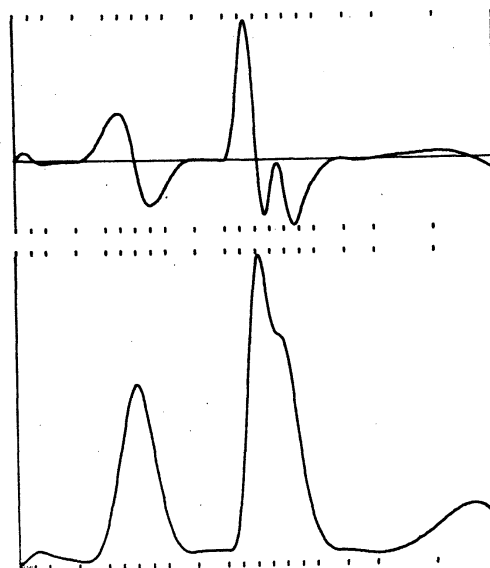
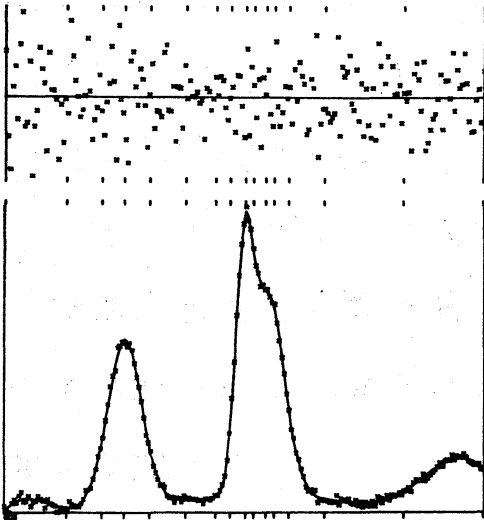


图 2.2b

CURVE FITTING BY SPLINES

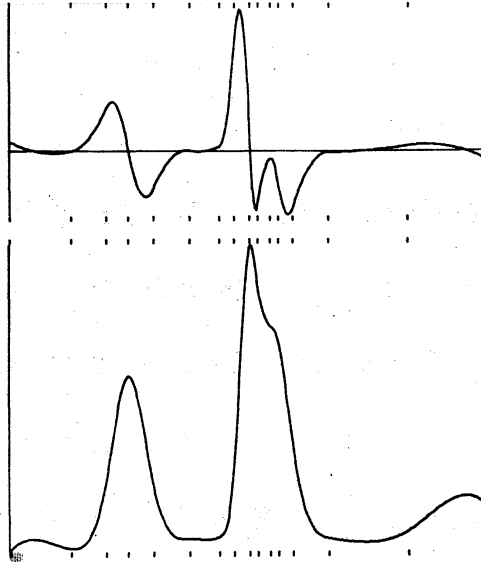
KPROG-3 N=15 K=4 DELTA**2=1.5352 (2)
 SIGMA**2=8.3895(-1) AIC=1.0478 (3)
 F(-4.0000(-1),1.5290 (2)),E(-8.6190(0),3.9578 (0))



☒ 2.3a

CURVE FITTING BY SPLINES

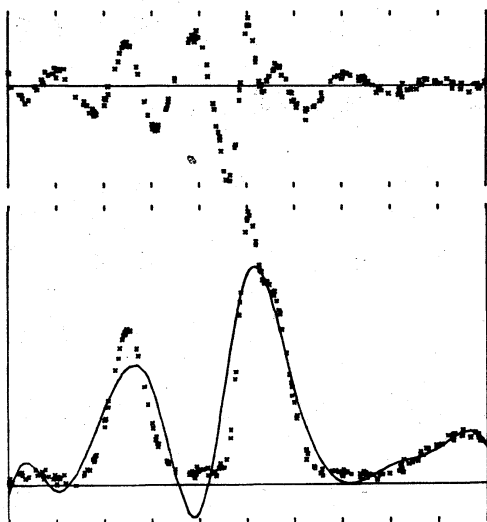
KPROG-3 N=15 K=4 DELTA**2=1.5354 (2)
 F(5.1587 (-1),1.5011 (2)),D(-9.5669(0),2.1072 (1))



☒ 2.3b

CURVE FITTING BY SPLINES

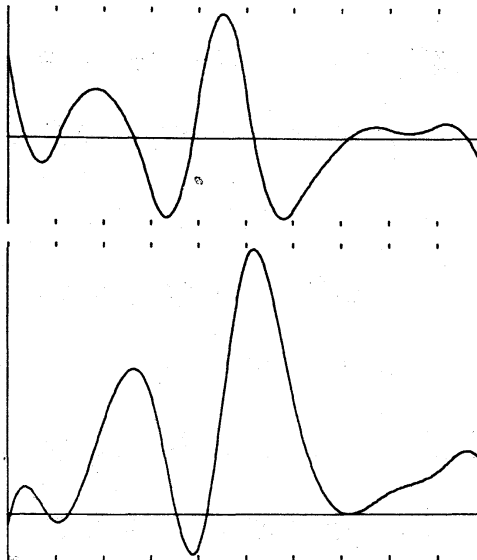
KPROG-1 N=10 K=4 DELTA**2=1.6124 (4)
 SIGMA**2=8.5767(1) AIC=1.9733 (3)
 F(-1.9599(1),1.5190 (2)),E(-4.8911(1),3.4919 (1))



☒ 2.4a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-1 N=10 K=4 DELTA**2=1.6125 (4)
 F(-1.9601(1),1.2120 (2)),D(-5.5906(0),8.5297 (0))



☒ 2.4b

られた結果であることを示す。

図 2.1a で $N=10$ とあるのは $n=10$, $K=4$ とあるのは $k=4$ (3次スプライン) であることを意味しており, DELTA^{**2} , SIGMA^{**2} , AIC はそれぞれ S_n^2 , σ_n^2 , AIC である。AIC は 1 つだけ出して意味がないが参考として出力されている。

図 2.1a で下段の *印は \bar{f}_r , 実線は得られた近似関数 $S(x)$ で $F(\quad)$ 内の数字は縦軸の下端, 上端の値である。上段の *印は残差 $\bar{e}_r = \bar{f}_r - S(\bar{x}_r)$ で $E(\quad)$ 内の数字は縦軸の下端, 上端である。又, 上段, 下段の図の上端, 下端の目盛は節点 x_i の位置をあらわす。

次に, 図 2.1b の下段は近似関数 $S(x)$ (図 2.1a の下段から *印を除き全区間を $N-1$, より細かく等分して縦方向のスケールを変えてプロットしたもの) で, 上段は $S(x)$ の導関数 $dS(x)/dx$ である。 $F(\quad)$, $D(\quad)$ 内の数字はそれぞれ下段, 上段の縦軸の下端, 上端の値である。

(図 2.1a-図 2.1b)以外の図についても同様である。

さて, 図 2.1~図 2.6 はプログラムチェックのために作製したデータ, すなわち 4次多項式と Gauss 分布曲線 (平均値, 分散をいろいろに変えて 5種類) の線型結合に 1%程度の標準偏差を持つ擬似正規乱数を加えたものをデータとして使って得られた結果である。ここで図 2.1~図 2.3 は等間隔デー

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-2 N=24 K=4 DELTA**2=1.9478 (2)
 SIGMA**2=1.1194(0) AIC=1.1136 (3)
 F(-4.0000(-1),1.5190 (2),E(-4.2148(0),4.0515 (0))

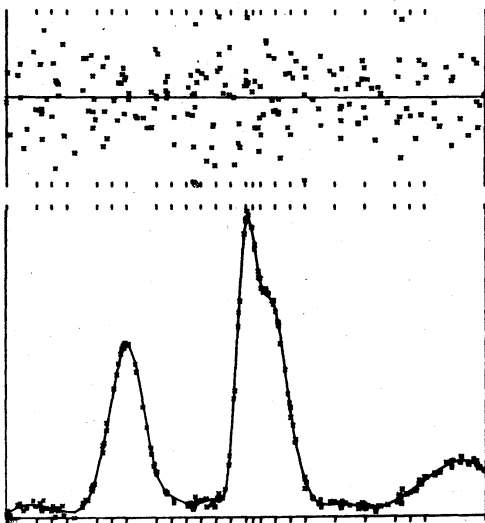


图 2.5 a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-2 N=24 K=4 DELTA**2=1.9480 (2)
 F(1.7924 (0),1.4800 (2),D(-9.2802(0),2.1481 (1))

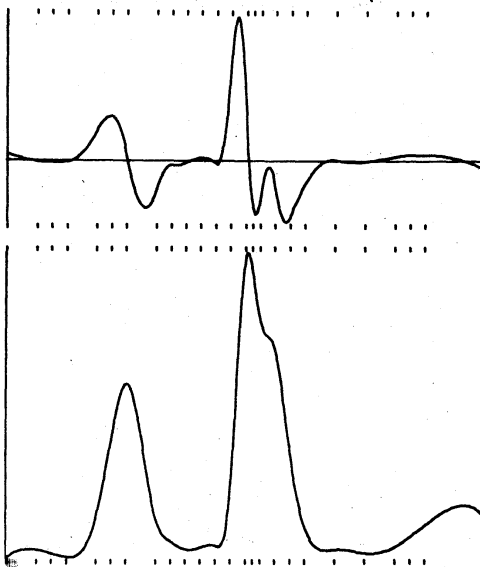


图 2.5 b

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-3 N=14 K=4 DELTA**2=1.6502 (2)
 SIGMA**2=8.9687(-1) AIC=1.0603 (3)
 F(-4.0000(-1),1.5190 (2),E(-4.5278(0),4.1802 (0))

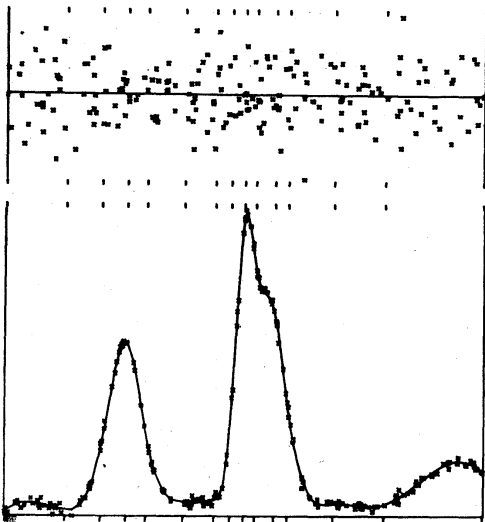


图 2.6 a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-3 N=14 K=4 DELTA**2=1.6504 (2)
 F(1.6182 (0),1.5062 (2),D(-9.2800(0),2.1888 (1))

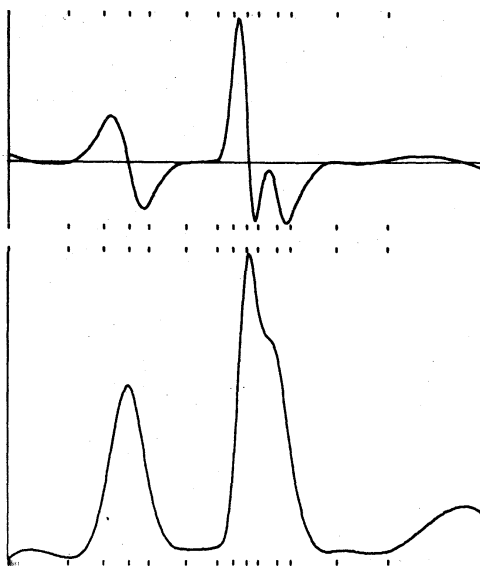
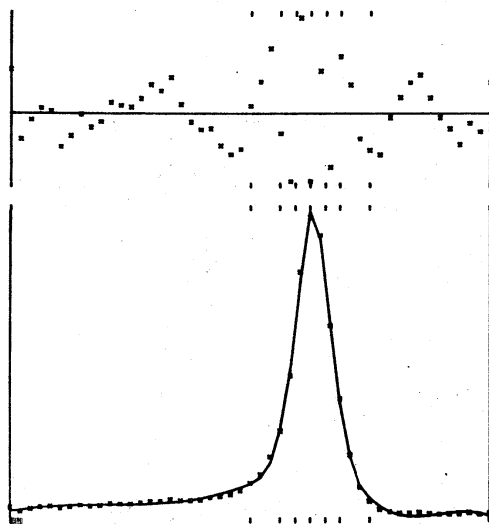


图 2.6 b

CURVE FITTING BY SPLINES

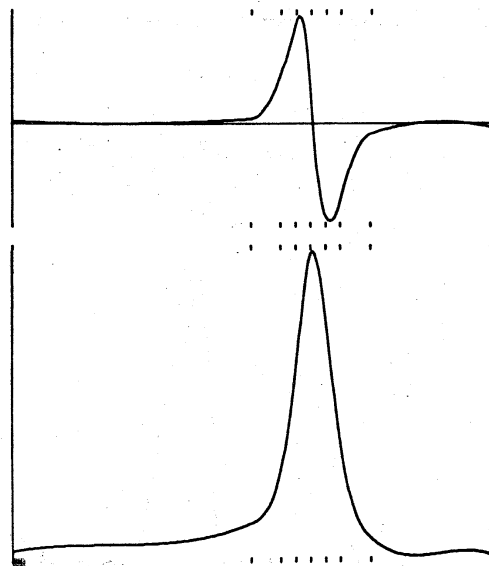
KPROG-2 N=8 K=4 DELTA**2=2.7497 (1)
 SIGMA**2=7.2362(-1) AIC=1.8439 (2)
 F(5.9155 (-1), 2.1895 (0)), E(-9.0658(-2), 4.8054 (-2))



2.7a

CURVE FITTING BY SPLINES

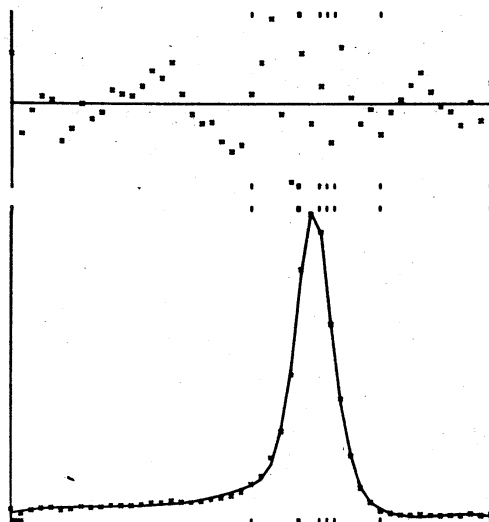
KPROG-2 N=8 K=4 DELTA**2=2.7500 (1)
 F(5.9109 (-1), 2.2119 (0)), D(-4.6995(-2), 5.1272 (-2))



2.7b

CURVE FITTING BY SPLINES

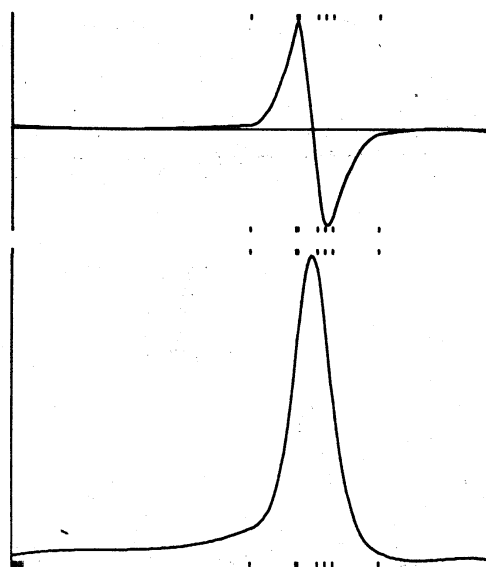
KPROG-3 N=8 K=4 DELTA**2=1.6399 (1)
 SIGMA**2=4.3155(-1) AIC=1.5906 (2)
 F(5.9705 (-1), 2.1788 (0)), E(-9.0475(-2), 9.2870 (-2))



2.8a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-3 N=8 K=4 DELTA**2=1.6400 (1)
 F(5.9711 (-1), 2.1821 (0)), D(-4.8295(-2), 5.5285 (-2))



2.8b

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-2 N=28 K=4 DELTA**2=3.0683 (2)
 SIGMA**2=1.8155(0) AIC=1.2072 (3)
 F(0.0000 (0),3.4804 (0)),E(-2.4709(-2),2.8699 (-2))

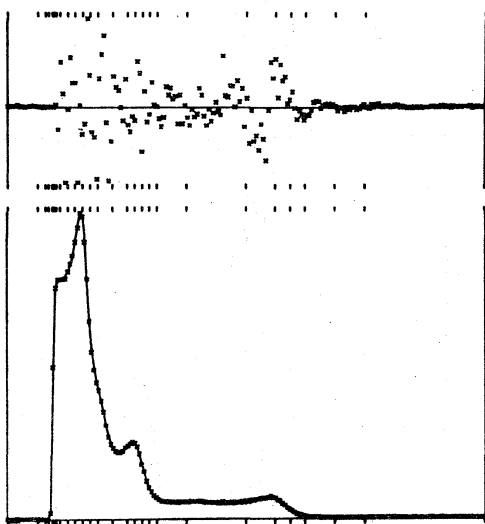


图 2.9 a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-2 N=28 K=4 DELTA**2=3.0686 (2)
 F(4.7079 (-6),3.4735 (0)),D(-4.8286(-1),6.7079 (0))

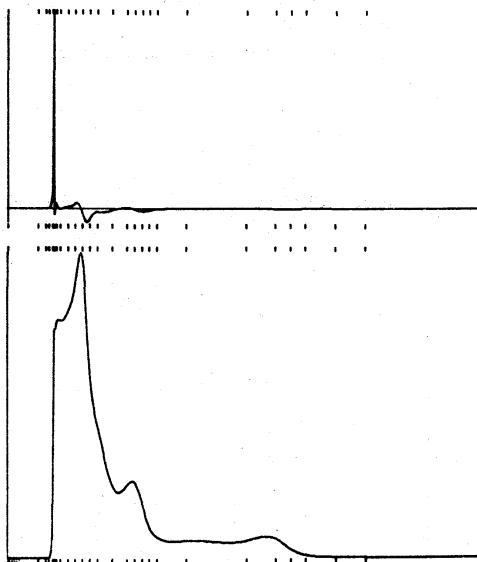


图 2.9 b

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-3 N=25 K=4 DELTA**2=2.2873 (2)
 SIGMA**2=1.3298(0) AIC=1.1425 (3)
 F(0.0000 (0),3.4804 (0)),E(-3.9902(-2),3.1984 (-2))

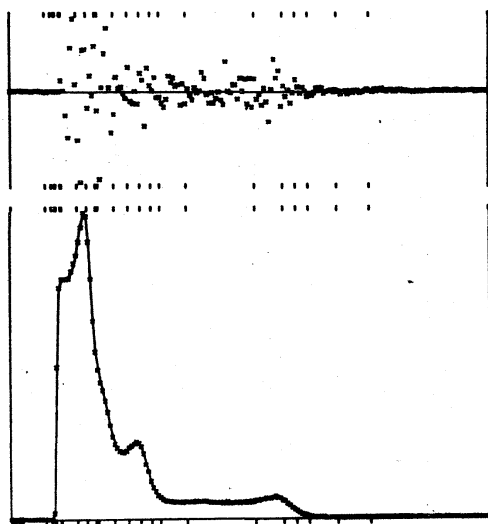


图 2.10 a

CURVE FITTING BY SPLINES

KPROG-3 N=25 K=4 DELTA**2=2.2875 (2)
 F(-3.1468(-4),3.4454 (0)),D(-4.7588(-1),1.9680 (0))

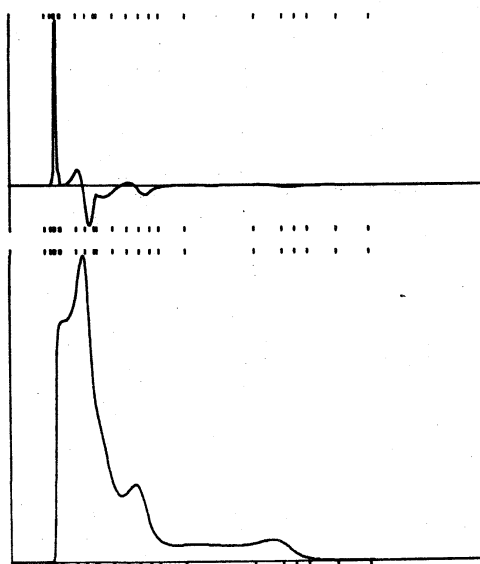
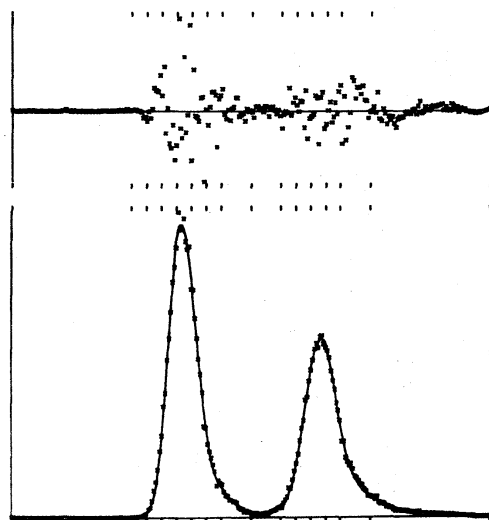


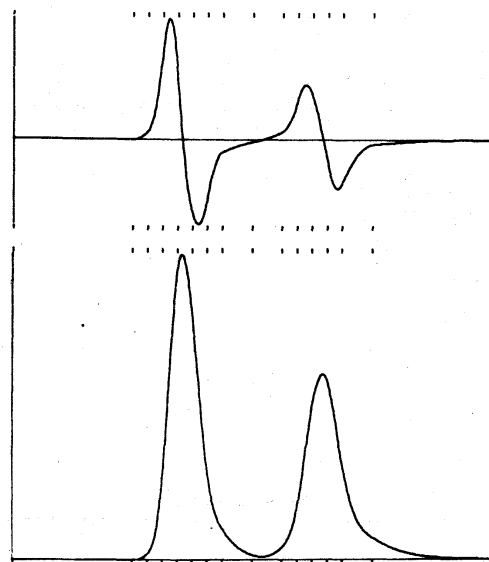
图 2.10 b

CURVE FITTING BY SPLINES
 KPROG-2 N=15 K=4 DELTA**2=2.9660 (2)
 SIGMA**2=1.2256(0) AIC=1.5160 (3)
 F(-2.5784(-4),1.7580 (-1)),E(-7.8941(-3),1.0359 (-2))



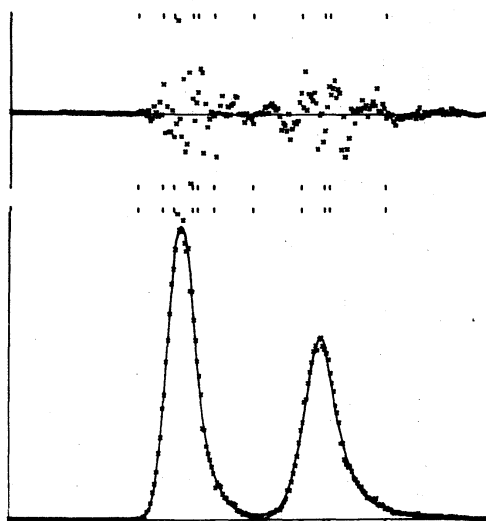
☒ 2.11 a

CURVE FITTING BY SPLINES
 KPROG-2 N=15 K=4 DELTA**2=2.9663 (2)
 F(-2.5786(-4),1.6870 (-1)),D(-1.1553(-2),1.6407 (-2))



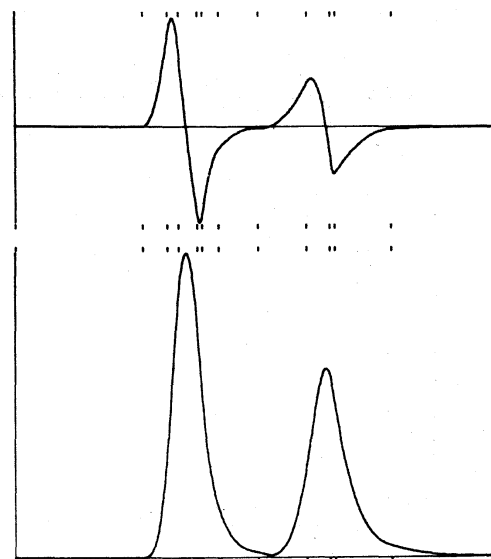
☒ 2.11 b

CURVE FITTING BY SPLINES
 KPROG-3 N=12 K=4 DELTA**2=3.0659 (2)
 SIGMA**2=1.2514(0) AIC=1.5186 (3)
 F(-1.5441(-4),1.7580 (-1)),E(-9.3199(-3),1.2519 (-2))



☒ 2.12 a

CURVE FITTING BY SPLINES
 KPROG-3 N=12 K=4 DELTA**2=3.0662 (2)
 F(-1.5449(-4),1.6842 (-1)),D(-1.4058(-2),1.5819 (-2))



☒ 2.12 b

タ、図2.4～図2.6は不等間隔データ（擬似一様乱数による）とした。これらの図を見較べると n を小さくとり、節点 x_i を等間隔として得た結果（図2.1で $n=10$ ）は満足できるものではない。節点を順に追加して得られる結果（図2.2）は、ほぼ満足しうる結果になる。更に節点を適当に修正すると更に好ましい結果（図2.3）になることかわかる。ただし、図2.3の結果を得るには図2.2の結果を得るのに較べて数十倍程度の計算時間がかかる。従って結果の比較にはこの点も考慮に入れなければならない。データが不等間隔で与えられるときにも（図2.4～図2.6）同じような傾向がみられる。尚、これらの計算では測定誤差はすべて $\bar{r}_r=1.5$ とした。又、誤差分布は、 $\pi_1=0.68$, $\pi_2=0.95$, $\pi_3=0.99$, $\pi_i=1.00$ ($i \geq 4$)とした。

解析関数に擬似正規乱数を加えて作ったデータでは、上のように明確な差が出るが実際の測定データを使った結果は（図2.7～図2.12）必ずしもそうではない。図2.7～図2.8では $\bar{r}_r=0.02$, 図2.9～図2.12では $\bar{r}_r=\sqrt{10^{-4} \cdot \bar{f}_r + 10^{-4}}$ とした。これらの図で $KPROG=2$ の結果と、 $KPROG=3$ の結果を比較すると、 n は殆んど変わらず得られる結果もさしたる差異はないように思われる。近似手法が非線型であることも相俟ってこのようにときに節点 x_i を動かすのが効果的であるかを解析するのは極めて困難で一般原則は得られていない。

3. スプラインによる曲面のあてはめ

前章で述べた手法をテンソル積により二変数化する。

x - y 平面上の格子点 (\bar{x}_r, \bar{y}_s) : $a \leq \bar{x}_r \leq b$, $c \leq \bar{y}_s \leq d$, $1 \leq r \leq M$, $1 \leq s \leq N$ において観測値 $\bar{f}_{r,s}$, 測定誤差 $\bar{\eta}_r \bar{\theta}_s$, 誤差の分布重 ω_i : $1 \leq i \leq 10$ が与えられたとき、

$$\Delta_x: a = x_0 < x_1 < \dots < x_m = b \quad (3.1)$$

$$\Delta_y: c = y_0 < y_1 < \dots < y_n = d$$

をそれぞれ x 方向, y 方向の節線(節点)とする双 $k-1$ 次の多項式スプライン

$$S(x, y) = \sum_{\beta=-k+1}^{m-1} \sum_{\alpha=-k+1}^{n-1} C_{\alpha, \beta} N_{\alpha}(x; \Delta_x) N_{\beta}(y; \Delta_y) \quad (3.2)$$

により曲面のあてはめを行う。ここで $N_{\alpha}(x; \Delta_x)$, $N_{\beta}(y; \Delta_y)$ は式(2.3)と同じようにして定義される正規化された B-spline である。

曲線の場合と同じように m, n , x_i : $1 \leq i \leq m-1$, y_j : $1 \leq j \leq n-1$ が固定されたとき残差自乗和

$$\delta_{m,n}^2 = \sum_{s=1}^N \sum_{r=1}^M \frac{1}{\bar{\eta}_r^2 \bar{\theta}_s^2} \left\{ \bar{f}_{r,s} - \sum_{\beta=-k+1}^{m-1} \sum_{\alpha=-k+1}^{n-1} C_{\alpha, \beta} N_{\alpha}(\bar{x}_r; \Delta_x) N_{\beta}(\bar{y}_s; \Delta_y) \right\}^2 \quad (3.3)$$

を $C_{i,j}$: $-k+1 \leq i \leq m-1$, $-k+1 \leq j \leq n-1$ で偏微分して 0 とおくと正規方程式を得ることかできるが、行列のクロネッカー積の性質を使うと正規方程式は次の 2 つの方程式

$$\sum_{\beta=-k+1}^{m-1} d_{\beta,i} \left\{ \sum_{\lambda=1}^N \frac{1}{\bar{\theta}_s^2} N_{\beta}(\bar{y}_s; \Delta_y) N_j(\bar{y}_s; \Delta_y) \right\}$$

$$= \sum_{\lambda=1}^N \sum_{r=1}^M \frac{1}{\bar{v}_r^2 \bar{\theta}_s^2} \bar{f}_{r,\lambda} N_i(\bar{x}_r; \Delta_x) N_j(\bar{y}_s; \Delta_y) \quad (3.4)$$

$$: -k+1 \leq j \leq m-1 \quad ; \quad -k+1 \leq i \leq m-1$$

及び

$$\sum_{\alpha=-k+1}^{m-1} C_{\alpha,\beta} \left\{ \sum_{r=1}^M \frac{1}{\bar{v}_r^2} N_{\alpha}(\bar{x}_r; \Delta_x) N_i(\bar{x}_r; \Delta_x) \right\} = d_{\beta,i} \quad (3.5)$$

$$: -k+1 \leq i \leq m-1 \quad ; \quad -k+1 \leq \beta \leq m-1$$

に分解され順に解けば、 $C_{\alpha,\beta} : -k+1 \leq \alpha \leq m-1, -k+1 \leq \beta \leq m-1$ を得ることが出来る。式(3.4) 及び式(3.5) の係数行列は、式(2.5) の係数行列と同じ性質を持っている。

以上の準備のもとに、曲線のあてはめるときと同じように、好ましい結果を得るために次のようにして $m, n, x_i : 1 \leq i \leq m-1, y_j : 1 \leq j \leq n-1$ を定める。

(i) $m=n=1$ として式(3.4), (3.5) から $C_{\alpha,\beta} : -k+1 \leq \alpha \leq m-1, -k+1 \leq \beta \leq m-1$ を算出し、 $\bar{e}_{r,\lambda} = \bar{f}_{r,\lambda} - \bar{S}(\bar{x}_r, \bar{y}_s)$ を計算して $P\{|\bar{e}_{r,\lambda} / \bar{v}_r \bar{\theta}_s| \leq i\} = \Psi_i : 1 \leq i \leq 10$ を求め、もし $\Psi_i \leq \Phi_i : 1 \leq i \leq 10$ が満足されていれば計算を終了する。そうでなければ(ii) の step へ進む。

(ii) $\bar{e}_{r,\lambda}$ から

$$\xi_i = \sum_{\{r | x_i \leq \bar{x}_r < x_{i+1}\}} \frac{1}{\bar{v}_r^2 N} \left\{ \sum_{\lambda=1}^N \frac{\bar{e}_{r,\lambda}}{\bar{\theta}_\lambda} \right\}^2$$

$$\zeta_j = \sum_{\{\lambda | y_j \leq \bar{y}_\lambda < y_{j+1}\}} \frac{1}{\bar{\theta}_\lambda^2 M} \left\{ \sum_{r=1}^M \frac{\bar{e}_{r,\lambda}}{\bar{v}_r} \right\}^2$$

を計算する。 $\{\xi_i | 0 \leq i \leq m-1\}$, $\{\zeta_j | 0 \leq j \leq n-1\}$ の最大値を ξ_i 又は ζ_j とする。 ξ_i が最大の場合は $x = (x_i + x_{i+1})/2$ を追加すべき新たな節線とし、 m を 1 だけ大きくする。 ζ_j が最大の場合は $y = (y_j + y_{j+1})/2$ を追加すべき新たな節線とし、 n を 1 だけ大きくする。

この後、式 (3.4), (3.5) から $C_{\alpha,\beta}$ を求め、 $\bar{e}_{r,\lambda} = \bar{f}_{r,\lambda} - S(\bar{x}_r, \bar{y}_\lambda)$ を計算して $P\{|\bar{e}_{r,\lambda}/\bar{v}_r \bar{\theta}_\lambda| \leq i\} = \Psi_i : 1 \leq i \leq 10$ を得て、 $\Psi_i \leq \Psi_{i+1} : 1 \leq i \leq 10$ が満足されていれば計算終了、そうでなければこの step を反復する。これらの各段階において曲線のあてはめるときと同じように統計量

$$S_{m,n}^2 = \sum_{\lambda=1}^N \sum_{r=1}^M \frac{1}{\bar{v}_r^2 \bar{\theta}_\lambda^2} \{ \bar{f}_{r,\lambda} - S(\bar{x}_r, \bar{y}_\lambda) \}^2$$

$$S_{m,n}^2 = S_{m,n}^2 / \{ M \cdot N - (m+k-1)(n+k-1) \}$$

$$AIC = M \cdot N \ln S_{m,n}^2 + 2(m+k-1)(n+k-1)$$

を計算する。又、(ii) の step の途中から節線 x_i, y_j を曲線のあてはめるときと同じようにして修正することからできる。

以下に上の手順で得られたいくつかの計算例を示す。

図3.1～図3.5はすべて上段が等高線、下段がそれに対応する立体図である。図中のコメント、ORIGINAL DATA はそれぞれが印された図は $\bar{f}_{r,s}$ の等高線、立体図であることを意味している。APPROXIMATION (1) は (\bar{x}_r, \bar{y}_s) における近似値。

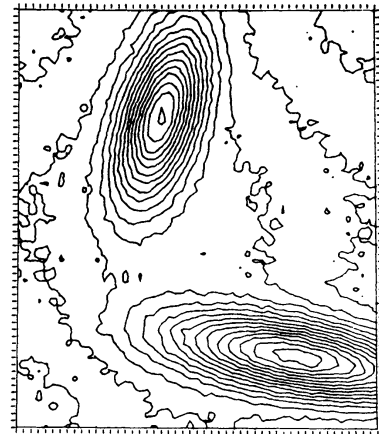
$S(\bar{x}_r, \bar{y}_s)$, RESIDUALS は $\bar{e}_{r,s} = \bar{f}_{r,s} - S(\bar{x}_r, \bar{y}_s)$ である。

APPROXIMATION (2) は x 方向、 y 方向を適当に等分した格子点上での近似値 $S(x, y)$ である。これは、データを与えられた点以外の点で $S(x, y)$ が大きく振動しているかどうかのチェックのための図である。等高線の周囲の目盛は ORIGINAL DATA については \bar{x}_r, \bar{y}_s 、他については x_i, y_j である。

KOSU=61×51 とあるのは $M=61, N=51$, IRU=1 は (\bar{x}_r, \bar{y}_s) が等間隔の格子、IRU=2 は不等間隔の格子であることを意味している。F() 内の数字は $\bar{f}_{r,s}$ の下限、上限の値 (RESIDUAL のときのみは $\bar{e}_{r,s}$ の下限、上限の値)、H(), NCLN=15 とあるのは等高線は15種類の高さ (等間隔) に対して引かれており、() 内の数字は、その下限、上限である。RHV() 内の数字は立体図の形を定めるパラメータである。

KPROG=1 は、その結果から m, n 及び x_i, y_j をあらかじめ与えて計算したもの、KPROG=2 とあるのは、節線 x_i, y_j を $m=n=1$ から始めて、順に追加していった得られた結果、KPROG=3 とあるのは (ii) の step の途中から節線を修正して得られた

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
ORIGINAL DATA KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(-1.0000(1),1.3000(2)),N(4,15)



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(2.0000(-1),4.0000(-1))
KPROG-1 K=4 N=12#10 AIC=2.7027 (4)
SIGMA**2=1.7939 (0) DELTA**2=5.2311 (3)

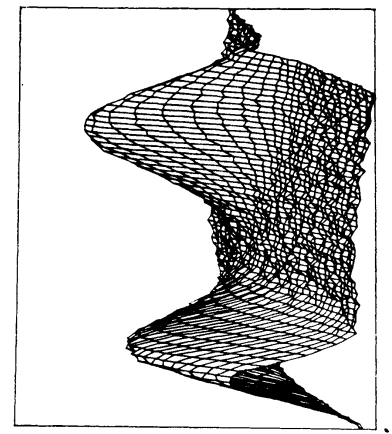
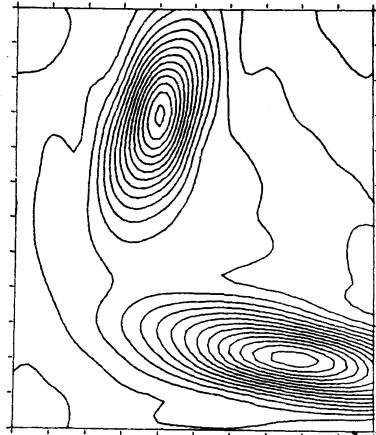


图 3.1 a

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(-1.0000(1),1.3000(2)),N(4,15)
KPROG-1 K=4 N=12#10 AIC=2.7027 (4)
SIGMA**2=1.7939 (0) DELTA**2=5.2311 (3)



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(2.0000(-1),4.0000(-1))
KPROG-1 K=4 N=12#10 AIC=2.7027 (4)
SIGMA**2=1.7939 (0) DELTA**2=5.2311 (3)

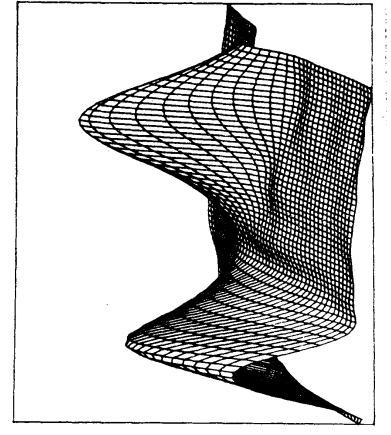
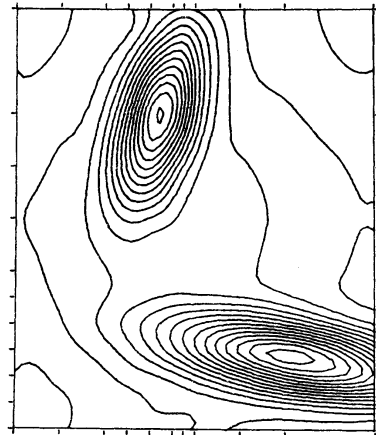


图 3.1 b

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(-1.0000(1),1.3000(2)),N(4,15)
KPROG-2 K=4 N=10#10 AIC=2.5357 (4)
SIGMA**2=1.0569 (0) DELTA**2=3.1093 (3)



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(2.0000(-1),4.0000(-1))
KPROG-2 K=4 N=10#10 AIC=2.5357 (4)
SIGMA**2=1.0569 (0) DELTA**2=3.1093 (3)

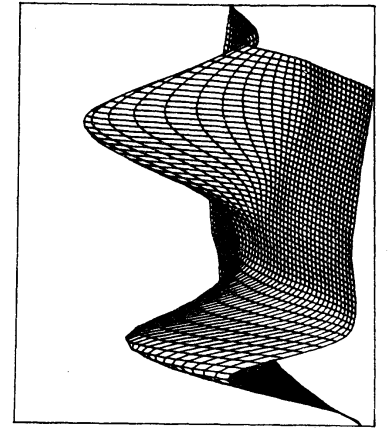
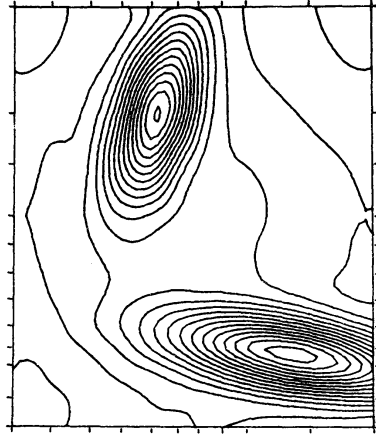


图 3.1 c

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(-1.0000(1),1.3000(2)),N(4,15)
KPROG-3 K=4 N=11#10 AIC=2.5315 (4)
SIGMA**2=1.0387 (0) DELTA**2=3.0423 (3)



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=61 #51 IRU=1
F(-1.6800(1),1.3790(2)),H(2.0000(-1),4.0000(-1))
KPROG-3 K=4 N=11#10 AIC=2.5315 (4)
SIGMA**2=1.0387 (0) DELTA**2=3.0423 (3)

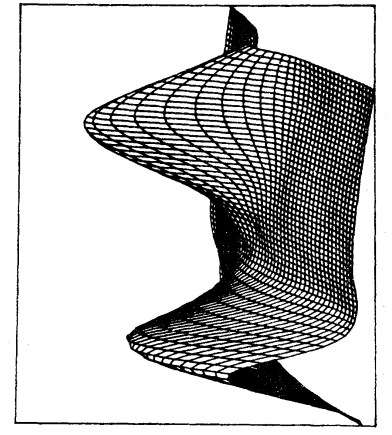
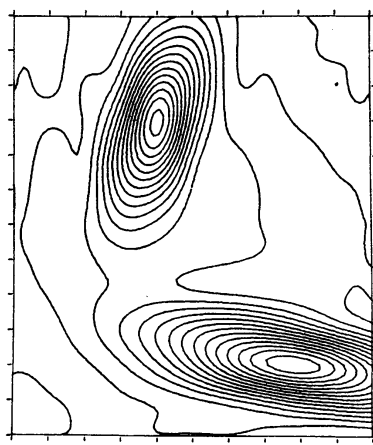


图 3.1 d

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
 APPROXIMATION(2) KOSU=61 #51 IRU=2
 F=-1.7600(1) 1.1.3750 (2) 1.1.0000(1) 1.1.3000 (2) 1.1.0000(1)
 KPROG=1 K=4 N=12#10 AIC=2.6197 (4)
 SIGMA#2=1.3735 (0) DELTA#2=4.0053 (3)



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
 APPROXIMATION(2) KOSU=61 #51 IRU=2
 F=-1.7600(1) 1.1.3750 (2) 1.1.0000(1) 1.1.3000 (2) 1.1.0000(1)
 KPROG=1 K=4 N=12#10 AIC=2.6197 (4)
 SIGMA#2=1.3735 (0) DELTA#2=4.0053 (3)

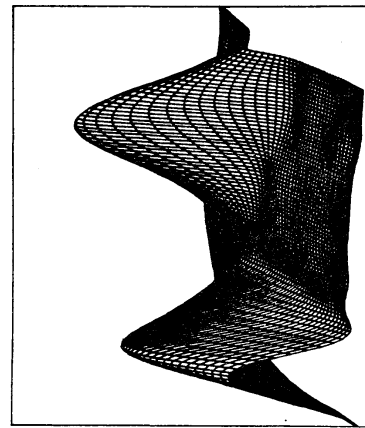
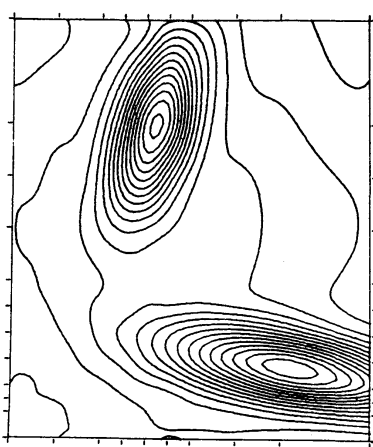


图 3.2e

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
 APPROXIMATION(2) KOSU=61 #51 IRU=2
 F=-1.7600(1) 1.1.3750 (2) 1.1.0000(1) 1.1.3000 (2) 1.1.0000(1)
 KPROG=2 K=4 N=11#9 AIC=2.5236 (4)
 SIGMA#2=1.0169 (0) DELTA#2=2.9928 (3)



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
 APPROXIMATION(2) KOSU=61 #51 IRU=2
 F=-1.7600(1) 1.1.3750 (2) 1.1.0000(1) 1.1.3000 (2) 1.1.0000(1)
 KPROG=2 K=4 N=11#9 AIC=2.5236 (4)
 SIGMA#2=1.0169 (0) DELTA#2=2.9928 (3)

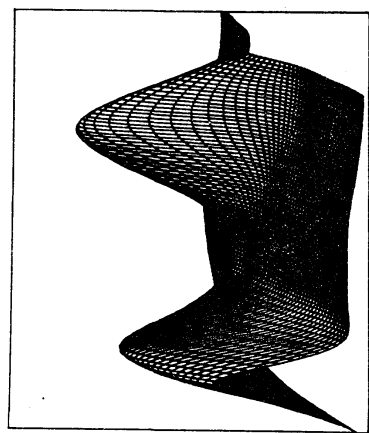
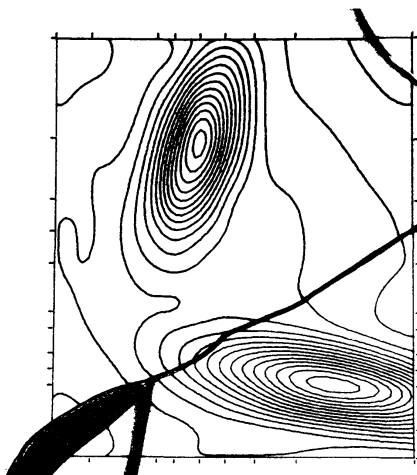


图 3.2f

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
 APPROXIMATION(2) KOSU=61 #51 IRU=2
 F=-1.7600(1) 1.1.3750 (2) 1.1.0000(1) 1.1.3000 (2) 1.1.0000(1)
 KPROG=3 K=4 N=11#8 AIC=2.5235 (4)
 SIGMA#2=1.0209 (0) DELTA#2=3.0188 (3)



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
 APPROXIMATION(2) KOSU=61 #51 IRU=2
 F=-1.7600(1) 1.1.3750 (2) 1.1.0000(1) 1.1.3000 (2) 1.1.0000(1)
 KPROG=3 K=4 N=11#8 AIC=2.5235 (4)
 SIGMA#2=1.0209 (0) DELTA#2=3.0188 (3)

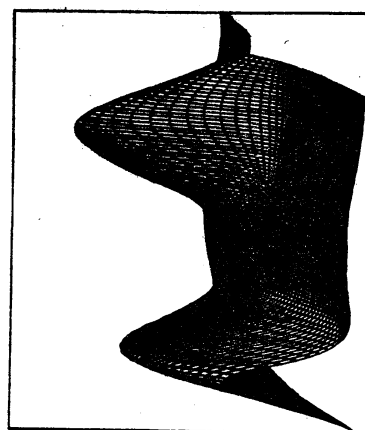
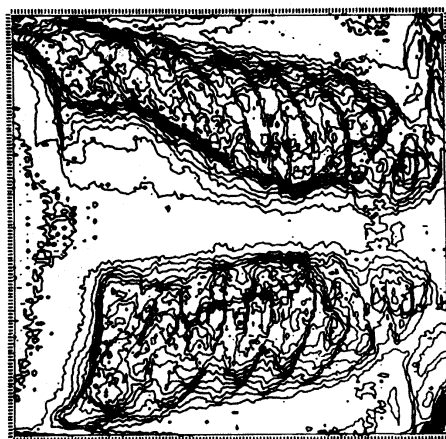
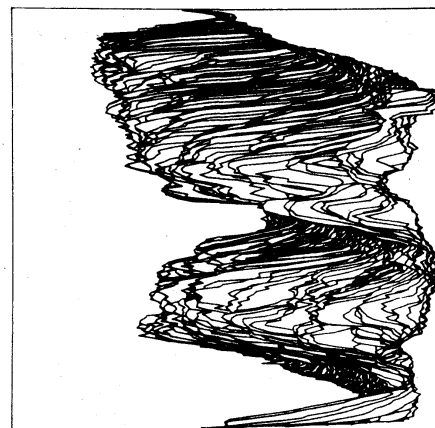


图 3.2g



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)

ORIGINAL DATA	KOSU=128*130	IRU=1
F(2,9000 (1),3.5100 (2))	RHW(2,0000 (1),4.0000 (1))	

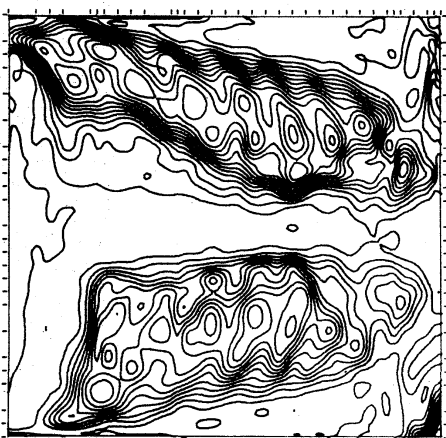


3.3 a

```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1)  KOSU=128*130  IRU=1
F12.9000 (1 1),3.5100 (2 1),H14.0000 (1 1),3.4000 (2 1),NCLN=16
KPROC=2  K=4  N=24*33  AIC=1.6364 (5
SIGMA**2=1.0601 (0 ) DELTA**2=1.6610 (4

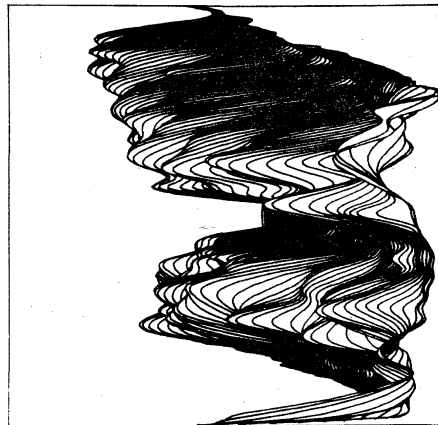
```



```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1)  KOSU=128#130  IRU=1
PRZ=9000  (1,3,5,500  (2 )),REV(2,0.000  (-1),4,0.000  (-1))
KFG0=2  K=4  N=24#33  AIC=1.6364
SIGMA=2-1.6610  (4)  DELTA=2-1.0601  (0)

```

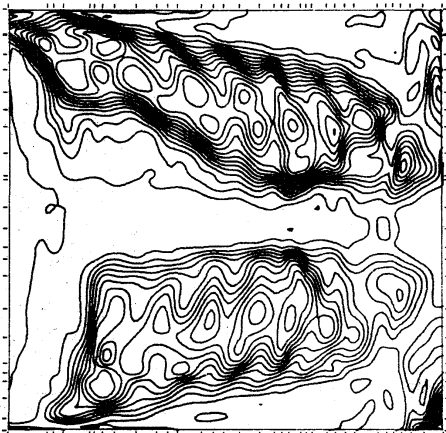


338

```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=128*130 IRU=1
F12.9000 (1) 7.3,5100 (2) 11.4,4.0000 (1) 7.3,4.000 (2) 7.1,4.1=16
KPROG=3 K=4 N=23*33 AIC=-1.6380 (5
SIGMA**2=-1.0722 (0) DELTA**2=-1.6838 (4

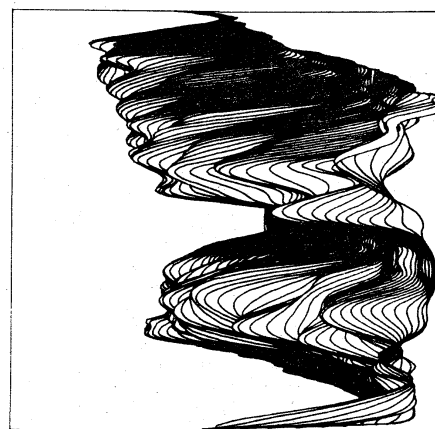
```



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)

APPROXIMATION(1) KOSU=128*130 IRU=1
F12.9000 (1,1)3.5100 (2,1)RHV(2,0000 (-1))4.0000 (-1,1)

STCMMG-3 K=4 N=23*33 AIC=1.6380 (5)
DELTA=2-1.6388 (4)

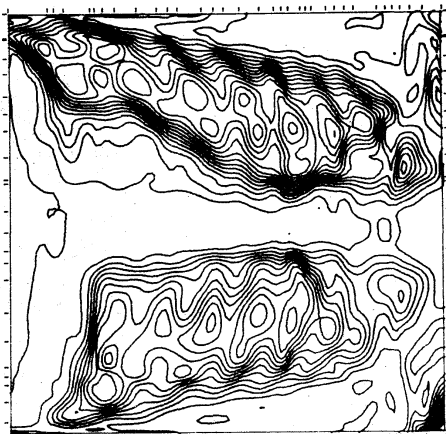


3.30

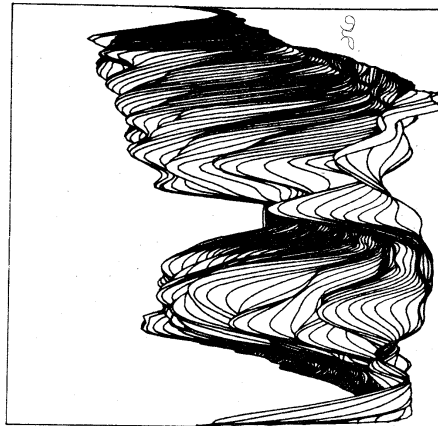
```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(2)   KOSU=128*130   IRU=1
F12.9000 (1) 3.5100 (2) 1.1141(4,0000 (1) 3.4000 (2) )NCLM=16
KROCG=3   K=4   N=23K33   AIC=1.6380 (5)
DELTA=2-1.0722 (0)   DELTA=2-1.6938 (4)
TCMA=3

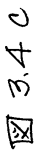
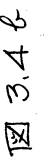
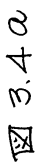
```



SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
 APPROXIMATION(2) KOSU=128*130 IRU=1
 F12.9000 (1,1,3,500 (2,1),RHV(2,0000 (-1),4,0000 (-1))
 KPROG=3 K=4 N=23*33
 SIGMA**2=1.0722 (0) AIC=-1.6380 (5)
 DELTA**2=1.6938 (4)



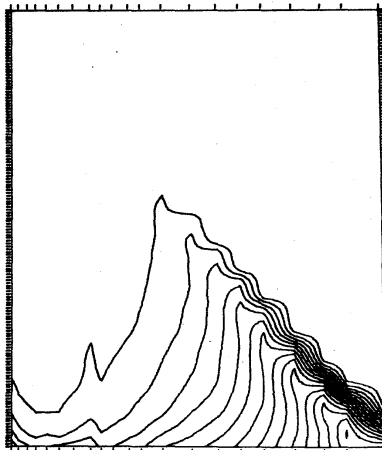
3.3d



```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
APPROXIMATION(1) KOSU=15#21 IRU=2
F10.0000 (0 ) 1.1.5005 ( ) H10.0000 (0 ) 1.1.5000 (0 ) HCU=16
KPROC=2 K=4 N=9#16 AIC=3.1695 (4)
SIGMA**2=3.6432 (0) DELTAM**2=4.8746 (3)

```

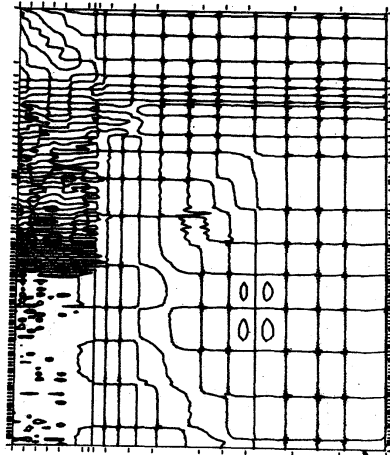


SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
ORIGINAL DATA KOSU-156*21 IRU-2
F(0.0000 (0),1.5085 (0),,RHV(2.0000 (-1),4.0000 (-1))

```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
RESIDUALS      KOSU=156#21      IRU=2
F(-1.0637(-1),-1.1047 (-1),-7.0000(-2),7.0000 (-2)),NCL=9
KPROG=2      K=4      N=99#16      AIC=3.1695 (4
SIGMA#2=3.6432 (0 ) DELTA#2=4.8746 (3

```



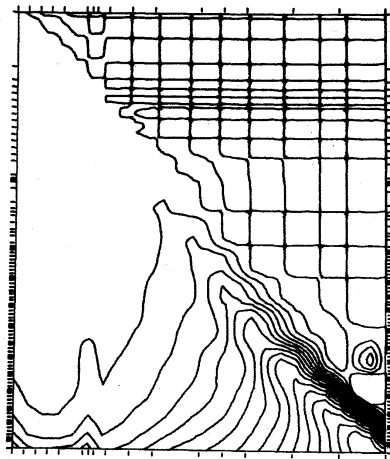
```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)
RESIDUALS      KOSU=156#21      IRU=2
F=1.0657 (-1.1,1.1),1047 (-1,1),REV(2.0000 (-1),4.0000 (-1))
,PROG=2      K=4      N=99#16      AIC=3.1695 (4 )
,IGMA#2=2-3.6432 (0 )      DELTA#2=4.8746 (3 )

```

SURFACE FITTING BY SPLINES (M)

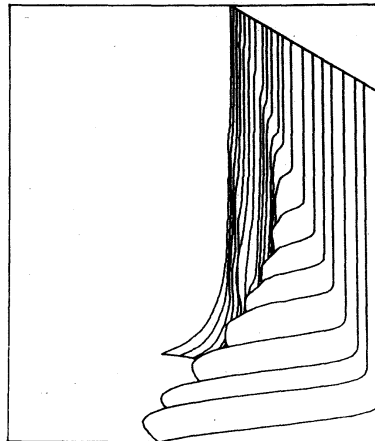
APPROXIMATION(2)	KOSU=156#21	IRU=2,
F10.0000 (0),1.15655 (0),10.0000 (0),1.15000 (0),1.14141#18		
KPROG=2	K=4	N=99#16
		AIC=3.1695 (4)
SIGMA#2=3.6432 (0)	DELTA#2=4.8746 (3)	



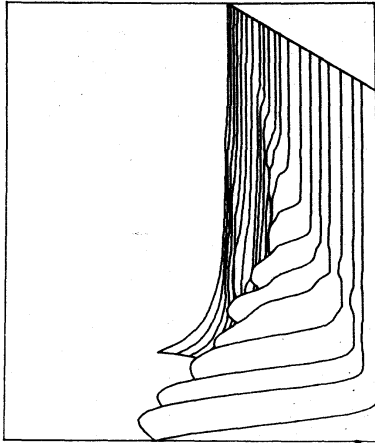
SURFACE FITTING BY SPLINES (M)

APPROXIMATION(2) KOSU=156*21 IRU=2.
F10.0000 (0) 1.1,5035 (0) 1, RMV(2,0000 (-1) 14,0000 (-1))

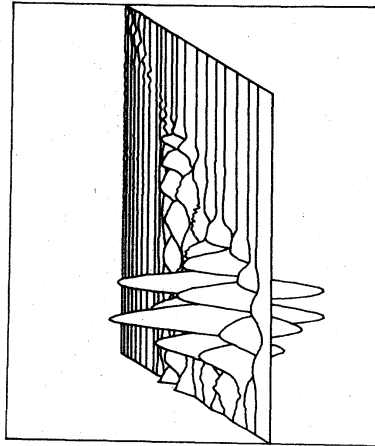
KPROG=2 K=4 N=99*16 AIC=3.1695 (4)
SIGMA**2=3.6432 (0) DELTA**2=4.8746 (3)



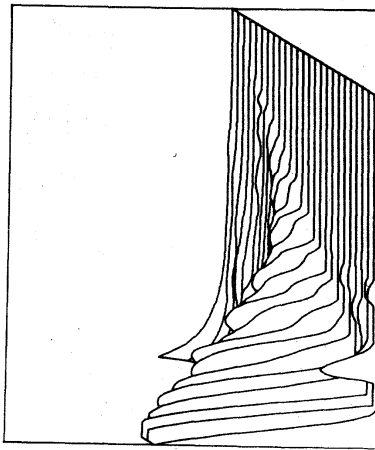
3.5a



3.58



550



85B

結果であることを示す。

$K=4$ は $n=4$ (双3次). $N=12 \times 10$ は $m=12$, $n=10$ であることを意味しており. AIC , $SIGMA^{**2}$, $DELTA^{**2}$ はそれぞれ, AIC , $G_{m,n}^2$, $\delta_{m,n}^2$ である.

さて、図3.1～図3.2 はプログラムチェックのために作製したデータ. すなわち双4次多項式と Gauss 分布曲面 (2種類) の線型結合に 1% 程度の標準偏差を持つ擬似正規乱数を加えたものをデータとして使って得られた結果である. 図3.1 は等間隔データ. 図3.2 では不等間隔データとしている. 図3.2a～図3.2d だけでは結果が良好かどうかの判断がつきにくいので APPROXIMATION (2) を図3.2e～図3.2f に載せた.

図3.3 は胸部 X線写真のデータ. 図3.4 は地形図のデータである. 図3.5 は有機シンチレータに、あるエネルギーを拂つ中核子が入射したときのシンチレータの発光量分布である.

4. 曲節線を持つスプラインについて

前章で示したいくつかの数値例のうち、最後の例は極めて不満足な結果となっている. これは、元の関数が座標軸に平行でない曲線に沿って急激に変化しているためであると思われる. 一般に、多項式スプラインをテンソル積により多変数化した場合、得られる多変数スプラインは座標軸に平行な直線に沿って関数値が急変しているか、或いは不連続線がある

ような関数でも表現しうる能力を持っている。しかし座標軸に平行でない曲線に沿って関数値が急変しているような関数に対してはテンソル積による多変数化では良好な近似は期待できない。

上の事は、曲面のあてはめに特有の困難さに起因している。たとえば、境界値問題のような関数方程式では、局所的に誤差が極めて小さくなったとしても特に不適合が生ずる訳ではなく、誤差の最大値が適当な値以下であればそれで十分である。これに反して曲面のあてはめでは、ある部分領域で誤差が小さくなり過ぎるという事はその領域ではノイズに過度に追従している事を意味しており良好な結果とはなり得ない。極言すれば曲面のあてはめにおいて、テンソル積による多変数化の手法を安んじて適用できるのは、観測値が $f(x, y) = u(x) + v(y)$ 、或いは $f(x, y) = u(x) \cdot v(y)$ のような形の関数にノイズが加わっているときに限られると言える。そうでないデータに対しては、うまくわけは儲け物という事である。

ここで一つの可能性ある関数として、曲節線をつなぐスプラインについて述べ、それによって創る曲面の一例を示す。

B-spline を使って、曲節線をつなぐスプラインを次のように定義する。

$$S(x, y) = \sum_{\beta=-k+1}^{m-1} \sum_{\alpha=-k+1}^{m-1} c_{\alpha, \beta} N_{\alpha}(x; \Delta x) N_{\beta}(y; \Delta y)$$

$$\begin{cases} \Delta x: a=x_0 < \hat{x}_1(y) < \hat{x}_2(y) < \dots < \hat{x}_{m-1}(y) < x_m=b \\ \Delta y: c=y_0 < \hat{y}_1(x) < \hat{y}_2(x) < \dots < \hat{y}_{m-1}(x) < y_m=d \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}_i(y) = \sum_{\beta=-k+1}^{q-1} \text{dip}_{\beta} N_{\beta}(y; \Delta y) \\ \hat{y}_j(x) = \sum_{\alpha=-k+1}^{p-1} e_{j\alpha} N_{\alpha}(x; \Delta x) \end{cases} \quad (4.1)$$

$$\begin{cases} \Delta \tilde{y}: c=y_0 < \tilde{y}_1 < \tilde{y}_2 < \dots < \tilde{y}_{p-1} < y_p=d \\ \Delta \tilde{x}: a=x_0 < \tilde{x}_1 < \tilde{x}_2 < \dots < \tilde{x}_{p-1} < x_p=b \end{cases}$$

ここで $\hat{x}_i(y)$, $\hat{y}_j(x)$ はそれぞれ x 方向, y 方向の曲節線である。 y を固定して x を増加させていくとき, x が $\hat{x}_i(y)$ を越えるとき, $\partial^k S(x, y) / \partial^k x$ に跳躍を生ずる。もし $\hat{x}_i(y)$ がある点で本数変なっているならば, そのような点では $S(x, y)$ は不連続になる。この様子も図 4.1 に示す。

図 4.1 では $k=4$ とし, $m=n=9$, すなわち曲節線の本数はそれぞれの方向も 8 本としていた。又, $q=20$, $p=24$ とし, 曲節線 $\hat{x}_i(y)$, $\hat{y}_j(x)$ (これらは一変数のスプラインでもある) を定義するための節点列, \tilde{y}_j , \tilde{x}_i は等間隔としていた。更に, dip , $e_{j\alpha}$ は曲節線上段の図のようになるように与えてゐる。 $S(x, y)$ の線型パラメータ $c_{\alpha, \beta}$ は簡単のために,

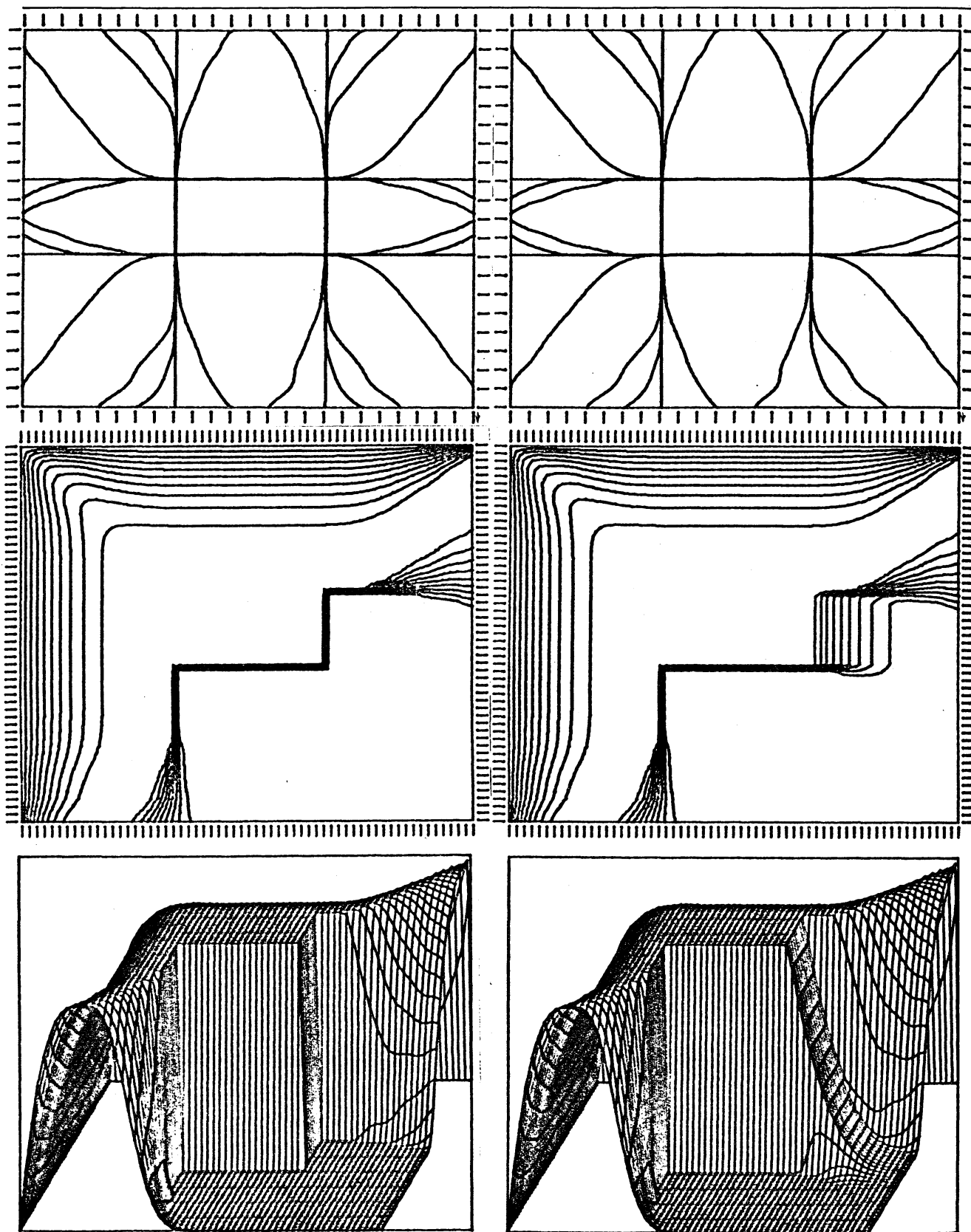


图 4.1

图 4.2

$$C_{\alpha, \beta} = 0 : \begin{cases} \alpha = -3 \\ -3 \leq \beta \leq 12 \end{cases} \quad \begin{cases} -3 \leq \alpha \leq 12 \\ \beta = 12 \end{cases} \quad \begin{cases} 1 \leq \alpha \leq 12 \\ -3 \leq \beta \leq 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 5 \leq \alpha \leq 12 \\ 1 \leq \beta \leq 4 \end{cases}$$

とし、その他の α, β については $C_{\alpha, \beta} = 1$ とした。その結果、得られる曲面の等高線は中段、立体図は下段のような形になる。曲節線 $\hat{x}_i(y)$, $\hat{y}_j(x)$ の何本かが離合集散してゐるため、ある部分では不連続、ある部分では滑らかな曲面となつてゐる。

図 4.2 は図 4.1 の場合から曲節線を 1 本削除し、 $m=8$, $n=9$ としたものである。曲節線 (この場合は直線) を削除した影響は不連続に変化する部分から、 x 方向の一次法線微分も不連続に変化するという形になつてあらわれてゐる。

これらの図では簡単のために 4 本の曲節線の重なつてゐる部分を直線としてゐるが、 $\hat{x}_i(y)$, $\hat{y}_j(x)$ は一価関数でさえあれば任意の形にしてよいので曲線に引いて $S(x, y)$ を不連続とすることも可能である。

この関数 $S(x, y)$ を使って曲面の近似を行ふとき、線型パラメータ $C_{\alpha, \beta}$ をきめるのは正規方程式を解くだけではないので容易である。しかし良好な近似を得るために $\hat{x}_i(y)$, $\hat{y}_j(x)$ の形をきめるのは (d_{ij} , $e_{j\alpha}$ 及び \hat{x}_i , \hat{y}_j の決定) は

筆者のこの手紙の検討には極めて困難に満足すべき結果は得られていない。

5. おわりに

本章で示した最後の例のようなデータは現実には存在し、又それを適当な関数で近似して任意の点における近似値を評価することにより、コストのかかるデータ収集を少しでも少くしたい要求はある。曲節線のスプラインはこのような要求に応え得る数少ない関数の一つであると思われるが、それを実際の問題にどのように適用してゆくかは今後の検討課題である。

最後に、日頃御指導頂く、名大、工、情報、福村晃夫教授、二宮市三教授に感謝します。

(参考文献)

- 1) 吉本他：区分的3次関数を用いたデータ平滑化，情報処理，Vol. 17, No. 3, pp 200-206 (1976)
- 2) 吉本他：区分的3次関数を用いた2次元データの平滑化の自動的方法，情報処理，Vol. 18, pp 128-134 (1977)
- 3) David L. B. Jupp : Approximation to data by splines with free knots, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 15, No. 2, pp 328-343 (1978)